
Teil 1 – Kurzbericht zum Förderprojekt „Druide“

Ausgangslage und ursprüngliche Aufgabenstellung

Das Projekt „Druide“ hatte das Ziel, ein innovatives Schadgasmesssystem zu entwickeln, das in der Lage ist, kritische Schadgase in den Filterstufen von Protonenaustauschmembran-(PEM)-Brennstoffzellen zuverlässig zu erkennen. Die angestrebte Lösung sollte insbesondere die Gase Kohlenmonoxid (CO), Ammoniak (NH₃) und Schwefelwasserstoff (H₂S) detektieren – Faktoren, die die Leistungsfähigkeit und Lebensdauer von Brennstoffzellen deutlich beeinträchtigen können.

Für die Umsetzung wurde an den Stand aktueller Forschung und Technik angeknüpft: Fortschritte in der Synthese gasochromer Farbstoffe, neue Verfahren zur Erzeugung reproduzierbarer Farbstoffschichten, sowie die Entwicklung kompakter optischer Auswertesysteme.

Ablauf des Vorhabens

Das Projekt wurde in mehreren Arbeitspaketen (AP) durchgeführt:

- **AP1:** Erstellung der Spezifikationen und Schnittstellendefinition im Rahmen eines Pflichtenhefts.
- **AP2:** Synthese gasochromer Farbstoffe und deren gasabhängige Charakterisierung; Analyse von Störgrößen.
- **AP3:** Entwicklung geeigneter Sensorschichten über Inkjet-Druck, einschließlich Auswahl geeigneter Einbettungsmatrizen, Optimierung des Lösungsverhaltens und Validierung des Druckprozesses.
- **AP4:** Konzeption und Aufbau eines Schadgasmesssystems, bestehend aus ein- und mehrkanaligen Sensorsystemen, Simulation und Auswahl optischer Komponenten, Entwicklung der Ansteuerungs- und Auswerteelektronik sowie modularer Systemsoftware.
- **AP5:** Aufbau eines Messstandes, Durchführung von Charakterisierungstests mit Zielgasen, Vibrations- und Rütteltests sowie Vorbereitung von Adaption und Feldtests.

Aufgrund technischer Herausforderungen und Priorisierung zentraler Entwicklungsschritte wurde der Projektzeitraum um sechs Monate verlängert. Die Arbeitspakete AP5.3, AP5.5 und AP5.6 konnten innerhalb des Förderzeitraums nicht vollständig realisiert werden.

Wesentliche Ergebnisse

Das Projekt liefert einen funktionsfähigen Demonstrator für ein modulares Schadgasmesssystem sowie erprobte Verfahren zur Herstellung und Integration gasochromer Sensorschichten in optische Messstrecken.

Zu den zentralen Resultaten zählen:

- Erfolgreiche Synthese und Charakterisierung gasochromer Farbstoffe.
- Etablierung von Inkjet-Druckverfahren für reproduzierbare Sensorschichten.
- Aufbau und Verifikation eines einkanaligen Funktionsdemonstrators und eines mehrkanaligen Messsystems.
- Entwicklung einer vollständigen Elektronik- und Softwarearchitektur zur Signalaufnahme, -analyse und Datenbereitstellung.

Die entwickelten Technologien bilden die Grundlage für eine praxisnahe Anwendung in der PEM-Brennstoffzellentechnik und ermöglichen die weitere Adaption für den Einsatz in mobilen und stationären Brennstoffzellenanwendungen.

Kooperationen

Die Arbeiten wurden in enger Zusammenarbeit zwischen den Partnern SmartGas, Fraunhofer IPM und Dataphysics durchgeführt. Dabei wurden Komponentenentwicklung, Farbstoffsynthese, Schichttechnologie sowie Aufbau und Testsysteme arbeitsteilig realisiert und aufeinander abgestimmt.

Gesamtabschlussbericht im BMBF- Rahmenprogramm „KMU-innovativ: Materialforschung (ProMat KMU)“

Vorhabenbezeichnung: Druide - Gedruckte, farbumschlagsbasierte Gassensoren zur Überwachung von Filterdurchbrüchen in PEM-Brennstoffzellen	
Zuwendungsempfänger: SmartGAS Mikrosensorik GmbH Fraunhofer IPM DataPhysics Instruments GmbH	Förderkennzeichen: 13XP5183A 13XP5183C 13XP5183B
Projektleitung: SmartGAS Mikrosensorik GmbH Hünderstraße 1, 74080 Heilbronn Tobias Henrich Tobias.henrich@smartgas.eu	Berichtszeitraum: 01.02.2023-31.07.25

Inhaltsverzeichnis

1.0	Einleitung	6
2.0	Projektziele und Motivation.....	6
3.0	Aufzählung der wichtigsten wissenschaftlich-technischen Ergebnisse und anderer wesentlicher Ereignisse.....	7
3.1	AP1 Spezifikation und Konzeptentwicklung	8
3.2	AP2 Synthese gasochromer Farbstoffe (IPM)	8
3.2.1	AP2.1 Farbstoffsynthese	8
3.2.2	AP2.2 Gasabhängige Charakterisierung.....	10
3.2.3	AP2.3 Untersuchung von Störgrößen	17
3.3	AP3 Schichtherstellung über Inkjet-Druck (Dataphysics)	18
3.3.1	AP3.1 Auswahl von Einbettungsmatrizen (IPM).....	18
3.3.2	AP3.2 Bestimmung des Lösungsverhaltens (IPM, Dataphysics).....	20
3.3.3	AP3.3 Entwicklung des Druckprozesses (Dataphysics).....	21
3.3.4	AP3.4 Schichtcharakterisierung	22
3.4	AP4 Konzeption und Entwicklung eines Schadgasmesssystems für Filterstufen von PEM	22
3.4.1	AP4.1 Erstellung des Systemkonzepts (Schadgasmesssystems)	22
3.4.2	AP4.2 Aufbau eines einkanaligen Sensors.....	22
3.4.3	AP4.3 Aufbau eines mehrkanaligen Sensors	23
3.4.4	AP4.4 Simulation der optischen Komponenten	24
3.4.5	AP4.5 Entwicklung der Ansteuerungs- und Auswerteelektronik	24
3.4.6	AP4.6 Softwareentwicklung des Messsystems.....	24
3.4.7	AP4.7 Service- und Kalibrierschnittstelle des Messsystems	25
3.5	AP5 Gasabhängige Charakterisierung	25
3.5.1	AP5.1 Aufbau des Messstandes.....	25
3.5.2	AP5.2 Charakterisierung der Zielgase	26
3.5.3	AP5.3 Untersuchung von Störgrößen	28
3.5.4	AP 5.4 Vibrations- und Rütteltests	29
3.5.5	AP5.5 Adaption am Brennstoffzellenzug	30
3.5.6	AP5.6 Durchführung von Feldtests	30
3.6	AP6 Öffentlichkeitsarbeit, Ergebnissicherung	30
3.7	Ergebniszusammenfassung	31

4.0	Vergleich des Vorhabenstands mit der ursprünglichen Arbeits-, Zeit- und Kostenplanung.....	32
5.0	Haben sich die Aussichten für die Erreichung der Ziele des Vorhabens innerhalb des angegebenen Berichtszeitraums gegenüber dem ursprünglichen Antrag geändert (Begründung)?	32
6.0	Sind inzwischen von dritter Seite FE-Ergebnisse bekannt geworden, die für die Durchführung des Vorhabens relevant sind?	33
7.0	Sind oder wurden Änderungen in der Zielsetzung notwendig?	33

Präambel

Im Rahmen des Projekts "KMU-innovativ: Materialforschung (ProMat_KMU) haben die beteiligten Partner smartGAS, Fraunhofer IPM und Dataphysics eng zusammengearbeitet, um innovative Lösungen zur Schadgasmessung zu entwickeln. Aufgrund der tiefen Vernetzung und der interdisziplinären Zusammenarbeit der Partner war es möglich, die Arbeitspakete nicht isoliert, sondern als integrative Kooperationsbeiträge zu betrachten. Diese enge Zusammenarbeit hat es ermöglicht, Synergien zu nutzen und die Projektziele effizienter zu erreichen.

Angesichts dieser kooperativen Arbeitsweise haben wir uns entschieden, einen gemeinsamen Abschlussbericht einzureichen. Dieser Bericht spiegelt die kollektiven Anstrengungen und Erfolge wider und verdeutlicht, dass die Arbeitspakete als gemeinschaftliche Beiträge aller Partner zu verstehen sind. Die Entscheidung, einen einheitlichen Bericht zu erstellen, unterstreicht die Bedeutung der Zusammenarbeit und die Untrennbarkeit der einzelnen Beiträge im Kontext des Gesamtprojekts.

In den einzelnen Überschriften ist vermerkt, welcher Projektpartner in dem jeweiligen AP zuständig war.

1.0 Einleitung

Der Abschlussbericht für das Förderprojekt DRUIDE im Rahmen des KMU-innovativ Programms gibt einen umfassenden Überblick über die erzielten Ergebnisse und die wissenschaftliche sowie wirtschaftliche Anschlussfähigkeit des Projekts.

2.0 Projektziele und Motivation

Die Hauptmotivation des Projekts DRUIDE war die Entwicklung eines gedruckten Gassensorsystems auf Basis speziell angepasster Farbumschlagmaterialien zur Zustandsüberwachung gasabsorbierender Filter in Brennstoffzellen. Im Projekt wurde die Filterüberwachung am Beispiel einer PEM-Brennstoffzelle durchgeführt. Da Abgase in Industrie- und Schwellenländern ein Problem für die Luftaufbereitung in PEM-betriebenen Fahrzeugen, Bussen oder Zügen darstellen. Entscheidend ist der Schutz des Katalysators (Platin) vor Schadgasen wie Kohlenstoffmonoxid (CO), Kohlenstoffdioxid (CO₂), Stickoxiden (NO/NO₂), Ammoniak (NH₃) und schwefelhaltigen Gasen (H₂S, SO₂). Daher wurde versucht im Rahmen des Projektes diese Gase selektiv nachzuweisen.

3.0 Aufzählung der wichtigsten wissenschaftlich-technischen Ergebnisse und anderer wesentlicher Ereignisse

Die folgende Abbildung zeigt die Arbeitsplanung alle Projektteilnehmer des Projektes und wird hier zur Übersicht über die einzelne Arbeitspakete aufgezeigt.

Arbeits- und Zeitplanung DRUIDE	beteiligte Partner	2023												2024					2025														
		1. Hj.			2. Hj.			3. Hj.			4. Hj.			5. Hj.	Projektmonate																		
Arbeitspakete		1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18	19	20	21	22	23	24	25	26	27	28	29	30		
AP 1 Spezifikationen und Konzeptentwicklung																																	
AP 1.1 Literaturrecherche	alle																																
AP 1.2 Erstellung Pflichtenheft																																	
AP 2 Synthese gaschromer Farbstoffe																																	
AP 2.1 Farbstoffsynthese	Fraunhofer IPM																																
AP 2.2 Gasabhängige Charakterisierung																																	
AP 2.3 Untersuchung von Störgrößen																																	
AP 3 Schichtherstellung über Inkjet-Druck																																	
AP 3.1 Auswahl von Einbettungsmatrizen	DataPhysics, Fraunhofer IPM																																
AP 3.2 Bestimmung Lösungsverhalten																																	
AP 3.3 Entwicklung des Druckprozesses																																	
AP 3.4 Schichtcharakterisierung																																	
AP 4 Konzeption und Entwicklung eines Schadgas-Messsystems für Filterstufen von PEM																																	
AP 4.1 Erstellung des Systemkonzepts (Schadgas-Messsystems)	smartGAS, Fraunhofer IPM																																
AP 4.2 Aufbau Demonstrator einkanaliger Sensor																																	
AP 4.3 Aufbau Demonstrator mehrkanaliger Sensor																																	
AP 4.4 Simulation der optischen Komponenten																																	
AP 4.5 Hardware Entwicklung Ansteuerungs- und Auswerteelektronik																																	
AP 4.6 Softwareentwicklung Messsystems																																	
AP 4.7 Service- und Kalibrierschnittstell des Messsystems																																	
AP 5 Gasabhängige Charakterisierung																																	
AP 5.1 Ausbau eines Messstandes	smartGAS, Fraunhofer IPM,																																
AP 5.2 Charakterisierung der Zielgase	Siemens																																
AP 5.3 Untersuchung von Störgrößen																																	
AP 5.4 Vibrations- und Rütteltests																																	
AP 5.5 Adaption am Brennstoffzellenzug																																	
AP 5.6 Durchführung von Feldtests																																	
AP 6 Öffentlichkeitsarbeit, Ergebnissicherung																																	
AP 6.1 Öffentlichkeitsarbeit, Ergebnissicherung	alle																																
Meilensteine																																	

Abbildung 1: Zeitplan des Projektes Druid.

3.1 AP1 Spezifikation und Konzeptentwicklung

In Zusammenarbeit mit den Projektpartnern wurde ein umfassendes Pflichtenheft erstellt, das alle relevanten Schnittstellen zwischen den einzelnen Modulen definiert. Darüber hinaus entstand ein erster Entwurf für das Konzept der Ansteuer- und Auswerteelektronik sowie der zugehörigen Software. Im Rahmen der Konzeptentwicklung wurden mögliche Komponenten und Funktionen identifiziert und diskutiert. Diese Spezifikation und das Konzept bilden die Grundlage für die weitere Entwicklung und Integration der Systeme

3.2 AP2 Synthese gasochromer Farbstoffe (IPM)

3.2.1 AP2.1 Farbstoffsynthese

Für jedes Zielgas wurden individuelle Farbstoffe evaluiert und ausgewählt. In Folgendem werden die verwendeten Farbstoffe und gegebenenfalls ihre Synthese vorgestellt und beschrieben.

Für die Schwefelwasserstoff-Detektion (H_2S) wurde ein farbiger Kupfer-Komplex (Cu-PAN) ausgewählt [L. Engel et al. *Sensors* 2019 19, 1182]. Dieser Komplex ist kommerziell nicht verfügbar. Folglich wurde er am Fraunhofer IPM durch die Versetzung von 1-(2-Pyridylazo)-2-naphthol H-PAN Liganden mit wässriger Kupferchlorid-Lösung im Molverhältnis 1:1 hergestellt (Abbildung 2).

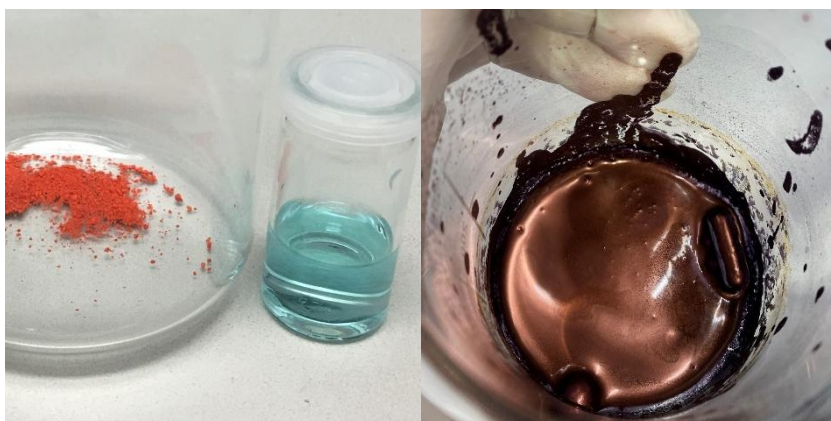


Abbildung 2: Fotos der verwendeten Edukte (links) und des synthetisierten Cu-PAN Komplexes (rechts).

Für die Detektion von Kohlenmonoxid (CO) wurde ein zweikerniger Rhodiumkomplex mit der Formel $[\text{Rh}_2\{(\text{XC}_6\text{H}_3)\text{P}(\text{XC}_6\text{H}_4)\}_n(\text{OCR})_2]_2\text{A}_2$ als Farbstoff eingesetzt. Der Rhodiumkomplex wurde durch die Erhitzung des Rhodium(II)-Acetat Dimers mit Triphenylphosphin und Eisessig als Liganden unter Rückfluss in Stickstoffatmosphäre nach der Literaturvorschrift synthetisiert [J. Esteban et al. *Angew. Chem. Int. Ed.* 2010, 4934-4937]. Durch die Komplexbildung während der Reaktion kommt es zur

Farbänderung der Reaktionsmischung wie in Abbildung 3 zu sehen ist. Das trockene Produkt ist violett (Abbildung 4) gefärbt.

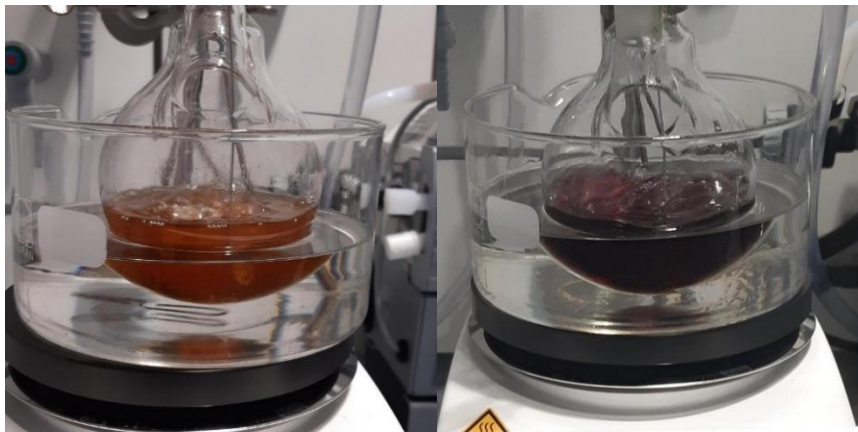


Abbildung 3: Fotos des Reaktionsmediums am Anfang der Reaktion (links) und des synthetisierten Farbstoffes am Reaktions-ende (rechts).



Abbildung 4: Fertiger Rhodium-Komplex-Farbstoff für CO.

Für den Nachweis von Ammoniak (NH_3) standen zunächst mehrere Farbstoffe zur Auswahl. Vor allem basensensitive pH-Indikatoren kommen für diesen Farbumschlag in Frage. Letztendlich wurde der kommerziell verfügbare pH-Indikator Bromkresolgrün als gasochromer Farbstoff für NH_3 ausgewählt [L. Engel et al. *IEEE International Conference on Flexible and Printable Sensors and Systems (FLEPS) 2019*].

Für Stickstoffdioxid (NO_2) sind ebenso mehrere sensitive Redoxindikatoren bekannt. Die Wahl fiel hier auf N, N' -Diphenylbenzidin (DPB), der eine irreversible gasochrome Reaktion mit NO_2 eingeht und die Erfassung kumulativer Gaskonzentrationen über einen definierten Zeitraum ermöglicht. Die weiteren Vorteile von DPB sind die geringen Anschaffungskosten und seine geringe Toxizität.

3.2.2 AP2.2 Gasabhängige Charakterisierung

Alle ausgewählten Farbstoffe wurden auf ihre Eignung für den Einsatz in den Sensoren mit einem UV/Vis Spektrometer bei Fraunhofer IPM untersucht. Die Farbstoffe wurden dazu, eingebettet in einer Polymermatrix, auf ein Substrat gedruckt. Die Zusammensetzung der verwendeten Matrizen war bei der Untersuchung noch nicht endgültig festgelegt, da die Tinten noch an die Anforderungen des Druckprozesses angepasst werden müssten. Die Farbstoffe für CO und NO₂ wurden zusätzlich in der Lösung untersucht, um mehr Erkenntnisse über das Löslichkeitsverhalten des Farbstoffes und seine Verträglichkeit mit der Matrix zu erlangen. Die Messungen wurden sowohl im Transmissions- als auch im Reflexions-Modus durchgeführt.

Die gasabhängige Charakterisierung der finalen Farbstoffschichten, die mit Inkjet-Printing auf die Glassubstrate bei DataPhysics bedruckt wurden, erfolgte bei SmartGAS.

Die Farbänderung des Cu-PAN-Komplexes in Anwesenheit von Schwefelwasserstoff resultiert aus der Störung der Bindungen im Chelat-Komplex (Abbildung 5), die durch die starken Wechselwirkungen zwischen dem Kupfer-Koordinationszentrum und dem Schwefelwasserstoff hervorgerufen wird. Das basische Milieu begünstigt die Reaktion aufgrund der Deprotonierung von H₂S. In Abbildung 6 ist die Reaktion des eingebetteten Farbstoffs gegenüber 8 ppm H₂S in feuchter Luft (40 % r.h.) dargestellt. Die Reaktion läuft schnell mit der Farbänderung von violett über rot zu gelb ab.

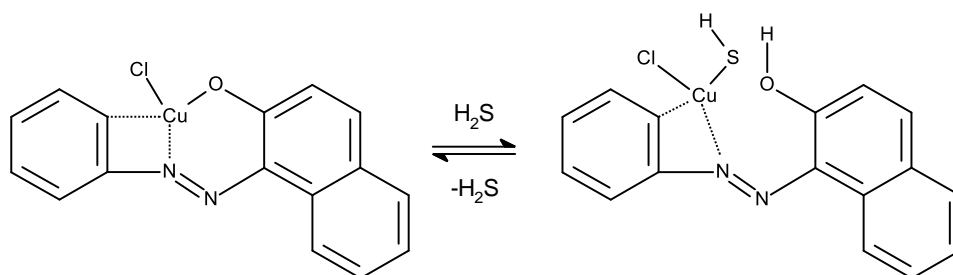


Abbildung 5:
 Schematische
 Darstellung der
 Wechsel-
 wirkungen
 zwischen Cu-
 PAN Komplex
 und H₂S Gas.

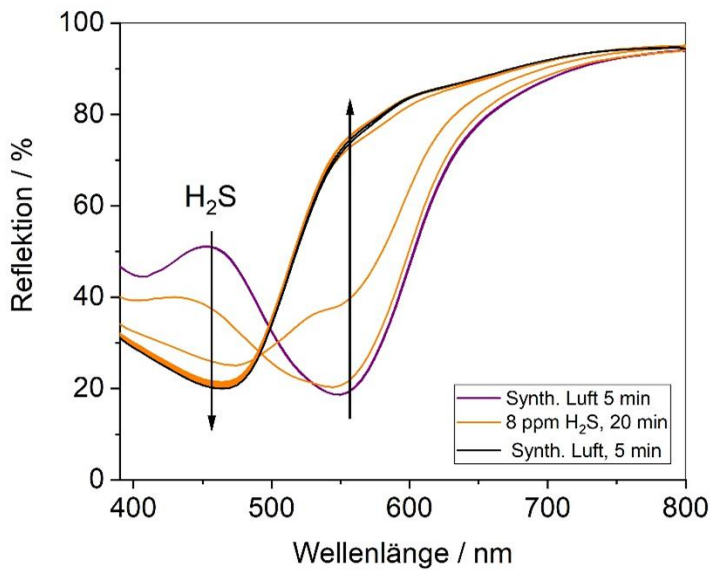


Abbildung 6: UV/Vis-Spektren des eingebetteten Cu-PAN-Farbstoffs auf einem mit Polyethylenfolie beschichteten Substrat bei Beaufschlagung mit 8 ppm H₂S und 40 % r.F.. Die Aufnahme der Spektren erfolgte alle 2 Minuten.

Die CO-Detektion mittels Rh-Komplexes beruht auf dem Austausch der axial angeordneten Essigsäure-Liganden durch CO-Liganden, zunächst an einem der Rh-Koordinationszentren und anschließend am anderen Zentrum, wie in Abbildung 7 dargestellt. [Pannek et al. *Sensors* 2018, 18, 1994] [K. Schmitt et al. *Chemosensors* 2018, 6, 14] Die Farbänderung von violett über rot zu gelb kommt durch die Verschiebung der Elektronendichte innerhalb des Komplexes aufgrund des Ligandenaustauschs zustande. Die größte Änderung findet im spektralen Bereich um 555 nm ($\Delta R = \text{ca. } 60\%$) statt.

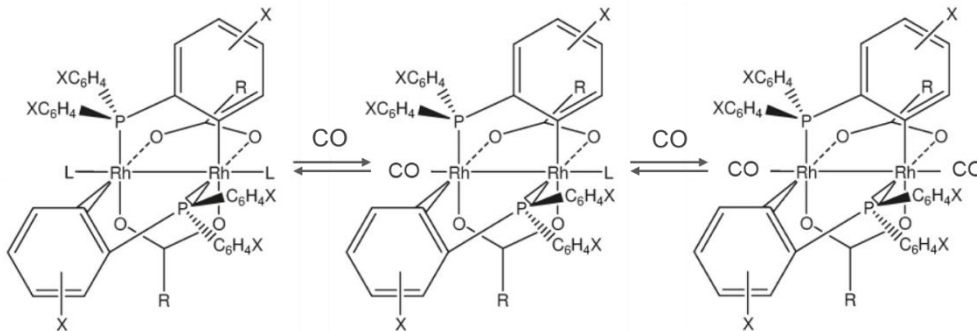


Abbildung 7: Schematische Darstellung der Wechselwirkungen zwischen Rh-Komplex und CO-Gas.

Die erste Untersuchung der Farbreaktion erfolgte in polymerhaltiger Lösung, die eine ähnliche Zusammensetzung wie die Inkjet-Tinte hatte (Abbildung 8). Die Spektren wurden vor und nach der Beaufschlagung der Lösung mit 100 ppm CO für 1h aufgenommen. Man sieht eine starke Abnahme der Transmission um die 475 nm ($\Delta T \sim 30\%$).

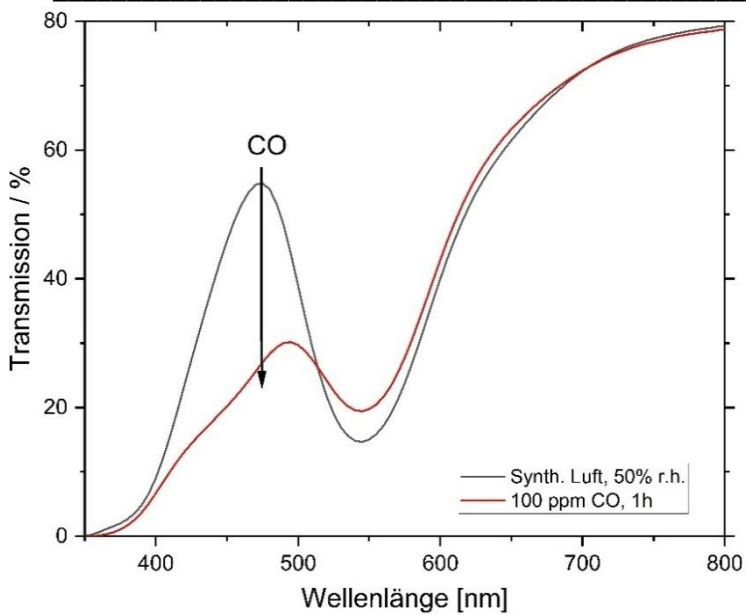


Abbildung 8: UV/Vis-Spektren der Rh-Komplex-Lösung vor und nach der Beaufschlagung mit 100 ppm CO.

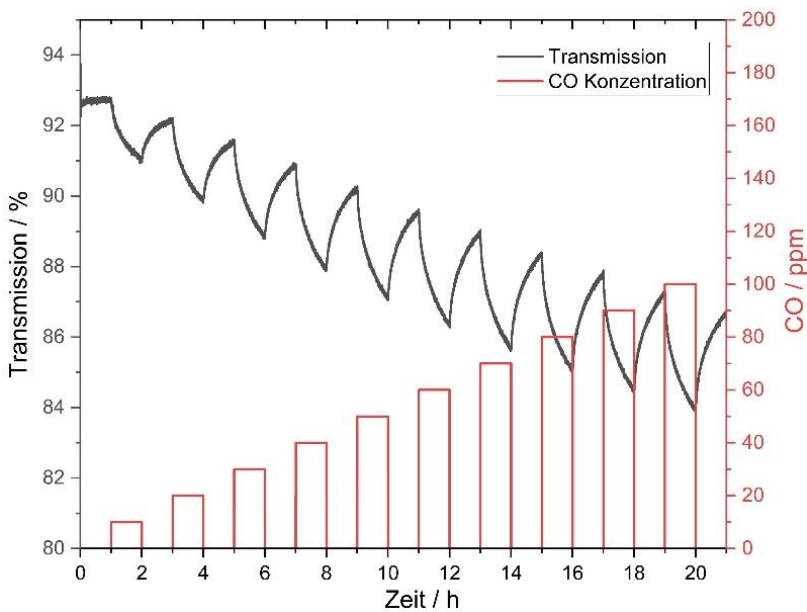


Abbildung 9: Zeitliche Änderung der Transmission bei 475 nm bei der Beaufschlagung der Rh-Komplex-Lösung mit unterschiedlichen CO-Konzentrationen.

Im Folgendem wurde ein zeitlicher Verlauf der Transmission bei 475 nm bei Beaufschlagung mit verschiedenen CO-Konzentrationen zwischen 10 ppm und 100 ppm für jeweils eine Stunde untersucht (Abbildung 9). Alle Konzentrationsstufen konnten detektiert werden und die Reaktion verlief reversibel.

In Kontrast zu dem gelöstem Rh-Komplex ist der Farbumschlag des Farbstoffes in der ausgewählten Polymermatrix nicht so stark ausgeprägt, wie die Abbildung 10 zeigt. Die Ursache liegt möglicherweise in der begrenzten Löslichkeit von CO in der Matrix und der langsamen Diffusion des Gases durch die Matrix. Die Erhöhung der Farbstoffkonzentration in der Matrix und damit der Reaktionszentren bewirkte keine

nennenswerte Verbesserung, da die Löslichkeit des Farbstoffes sich dadurch verschlechterte. Generell sind aggregierte Farbstoffmoleküle für die Reaktion schwer zugänglich und tragen zur Farbänderung wenig bei.

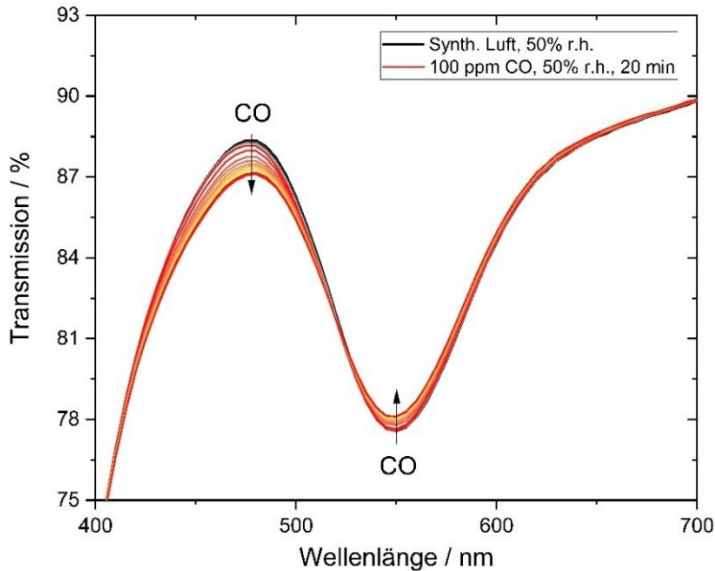


Abbildung 10: UV/Vis-Spektren des eingebetteten Rh-Komplexes auf einem Glassubstrat bei Beaufschlagung mit 100 ppm CO in feuchter Luft (50 % r.F.). Die Aufnahme der Spektren erfolgte alle 2 Minuten.

Die Aufnahme der zeitlichen Änderung der Transmission bei 470 nm und 550 nm infolge der Beaufschlagung mit 100 ppm CO zeigt jedoch an, dass diese CO-Konzentration erfasst wird (Abbildung 11). Im Folgenden wurde keine andere Polymermatrix getestet.

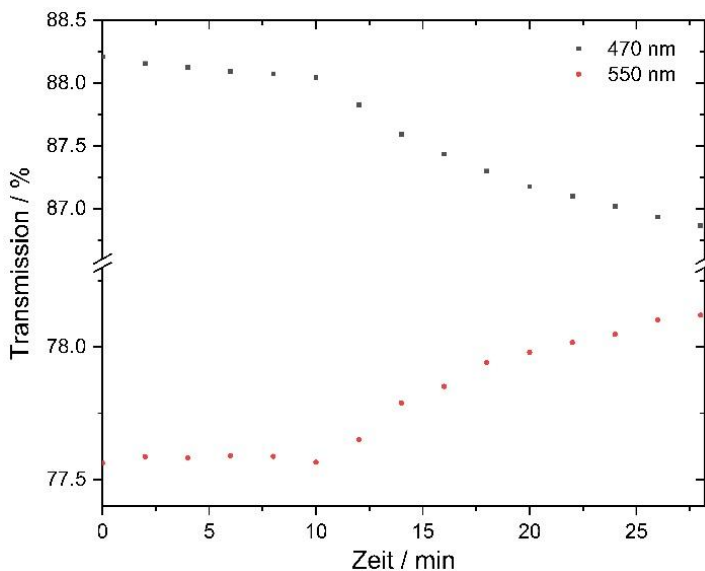


Abbildung 11: Zeitliche Änderung der Transmission bei 470 nm und 550 nm des eingebetteten Rh-Komplexes auf dem Glassubstrat infolge der Wechselwirkung mit 100 ppm CO in feuchter Luft (50 % r.F.).

Der Farbumschlag von Bromkresolgrün infolge der Wechselwirkungen mit NH_3 basiert auf Deprotonierung und der Änderung der Elektronenverteilung im Farbstoffmolekül (Abbildung 12).

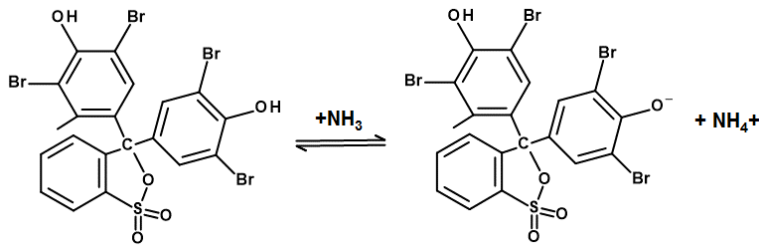


Abbildung 12:
Schematische
Darstellung der Wechsel-
wirkungen zwischen
Bromkresolgrün und
 NH_3 -Gas.

Die Änderung der Elektronenverteilung spiegelt sich im Farbumschlag von gelb zu grün. In Abbildung 13 sind die UV/Vis-Spektren des in einer Matrix eingebetteten Bromkresolgrün-Farbstoffes dargestellt, die vor, während und nach der Zugabe von NH_3 (10 ppm, 40 % r.F.) aufgenommen wurden. Die spektrale Änderung ist im Bereich um 620 nm am höchsten ($\Delta R = \sim 40$). Die Reaktion verläuft reversibel, die Rückreaktion ist aber langsamer als die Hinreaktion.

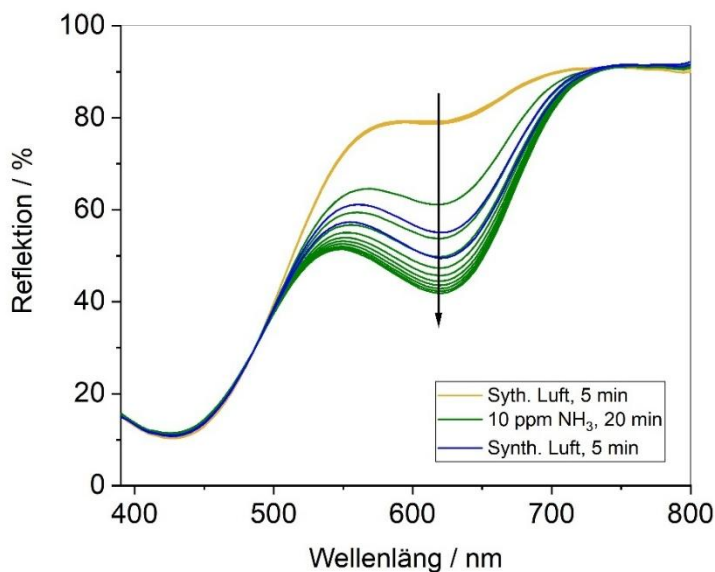


Abbildung 13: UV/Vis-
Spektren des
eingebetteten
Bromkresolgrün-
Farbstoffes auf einem
Glassubstrat bei
Beaufschlagung mit 10
ppm NH_3 in feuchter
Luft (40 % r.F.). Die
Aufnahme der Spektren
erfolgte alle 2 Minuten.

DPB ist ein aromatischer Redoxindikator, der durch das stark oxidierende NO_2 Gas oxidiert wird. Die Oxidation kann theoretisch über mehrere Stufen (1 bis 3) reversibel ablaufen (Abbildung 14). Dies wurde bereits bei der elektrochemischen Oxidation des Farbstoffes in der Lösung berichtet. In der Schicht, in der der Farbstoff in eine polymere Matrix eingebettet ist, kam es zu einer teilweisen Reduktion des Farbstoffes (Reaktionsschritt 1 und 2) durch NO_2 , was sich in einem Farbumschlag von transparent zu grünelb widerspiegelte. Die Reaktion blieb im untersuchten Zeitfenster irreversibel. Der dritte Schritt, mit einem Farbumschlag nach blau, wurde bei eingebettetem DPB nicht beobachtet.

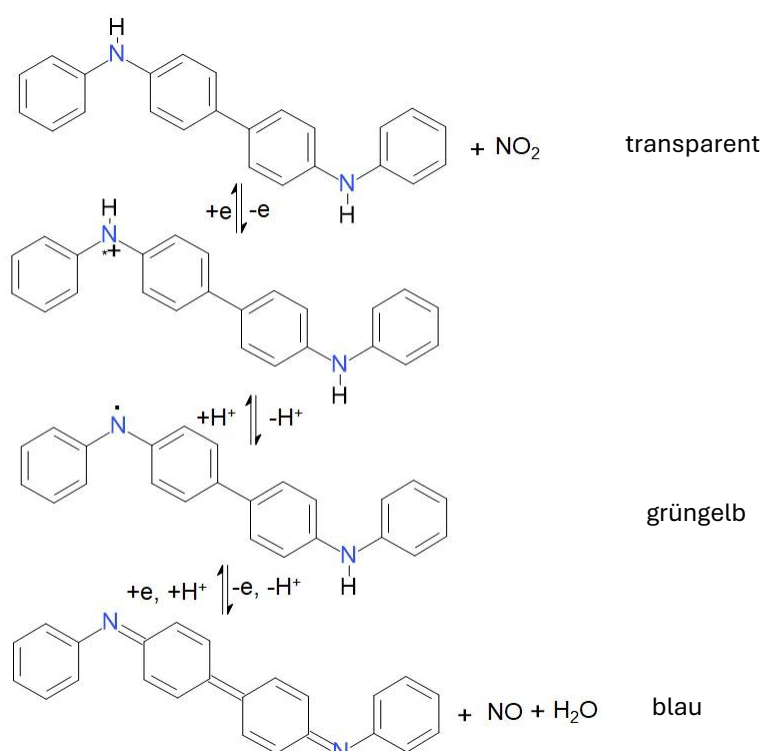


Abbildung 14:
 Schematische
 Darstellung der Wechsel-
 wirkungen zwischen DPB
 und NO_2 -Gas.

Die aromatische Struktur des DPB-Indikators stellte sich als hinderlich dar, da die Auflösung des Farbstoffs dadurch erschwert wurde und nur wenige gute Lösungsmittel zur Verfügung standen. Die ersten Messungen an den Farbstoffschichten, die aus Toluol- (Abbildung 15) oder Chloroform-haltigen DPB-Lösungen hergestellt wurden, zeigten einen vielversprechenden Verlauf der Transmission bei Beaufschlagung mit 5 ppm NO_2 für 1h ($\Delta T = \sim 3$). Chloroform war jedoch aufgrund des niedrigen Siedepunkts und der niedrigen Viskosität mit dem Inkjet-Druckverfahren nicht kompatibel. In der Toluol-haltigen Lösung blieb der Farbstoff nicht in der Lösung und fiel über die Zeit aus, was auf die schlechte Stabilität der Tinte hindeutete.

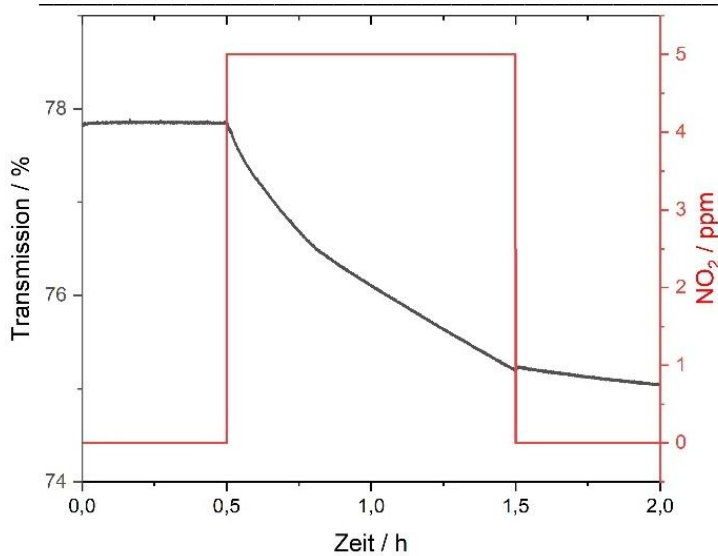


Abbildung 15: Zeitliche Änderung der Transmission bei 400 nm an einer DPB-Schicht auf einem Glsträger infolge der Beaufschlagung mit 5 ppm NO₂. Die Schicht wurde aus der Toluol-Lösung hergestellt.

Anschließend wurden weitere Lösungsmittel getestet. Die Wahl fiel auf Dimethylsulfoxid, da es sich als gutes Lösungsmittel für DPB erwies und aufgrund seiner physikalischen Eigenschaften eine hohe Kompatibilität mit dem Inkjet-Verfahren zeigt.

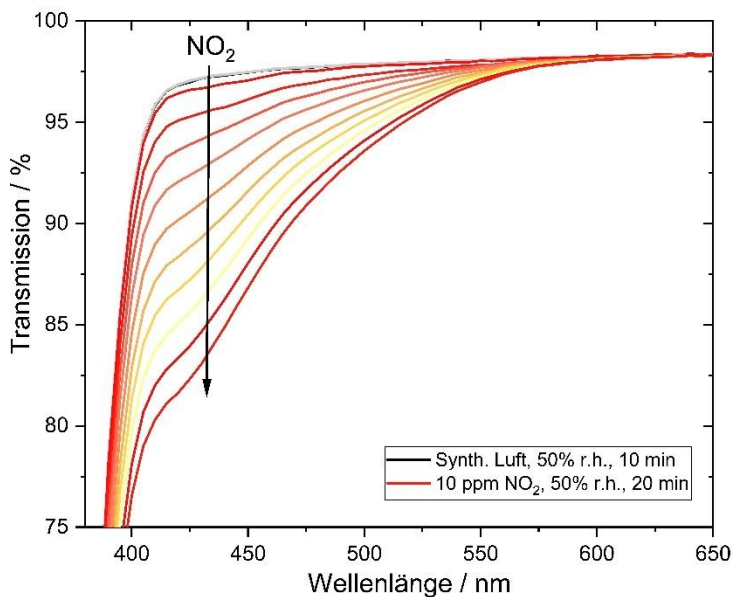


Abbildung 16: UV/Vis-Spektren des eingebetteten DPBs auf einem Glassubstrat bei Beaufschlagung mit 10 ppm NO₂ in feuchter Luft (50 % r.F.). Die Aufnahme der Spektren erfolgte alle 2 Minuten.

Dimethylsulfoxid zeigte ein verbessertes Auflösungsvermögen gegenüber DPB, was höhere Konzentrationen von DPB in der Polymermatrix erlaubte. In Abbildung 16 sind die UV/Vis-Spektren vor und während der Beaufschlagung des DPD in Polymermatrix mit 10 ppm NO₂ für 20 min sowie der entsprechenden Zeitverlauf der Transmission (Abbildung 17) bei drei ausgewählten Wellenlängen dargestellt. Die Ergebnisse zeigen eine höhere spektrale Änderung ($\Delta T \sim 16$) als für Toluol als Lösungsmittel.

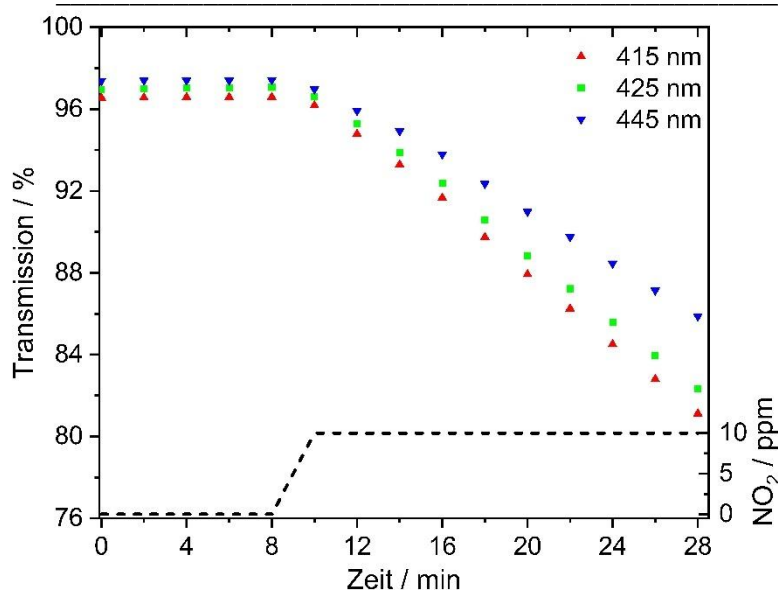


Abbildung 17: Zeitliche Änderung der Transmission bei drei Wellenlängen des eingebetteten DPBs auf einem Glasträger infolge der Beaufschlagung mit NO₂. (10 ppm, 50 % r.F.).

3.2.3 AP2.3 Untersuchung von Störgrößen

Bei den Untersuchungen an Rh-Komplex-Filmen wurden einige Störgrößen identifiziert. Es stellte sich heraus, dass bei der Herstellung der Filme ein besonderes Augenmerk auf dem verwendeten Lösungsmittel und der Matrix liegen sollte. Bestimmte Lösungsmittel wie Terpeneol oder Dimethylsulfoxid beeinflussen durch die starke Wechselwirkung den energetischen Zustand des Rh-Komplexes. In ihrer Anwesenheit kommt es zu keiner Farbänderung bei Beaufschlagung mit CO-Gas, da der Farbstoff bereits in seinem Grundzustand energetisch verändert wurde. Die Farbstofflösungen auf Basis von Terpeneol und Dimethylsulfoxid erscheinen nicht mehr violett, sondern gelb. Für die Herstellung der Tinten wurden demgemäß neutrale Lösungsmittel wie Ethanol und Butanol verwendet, die keine Wechselwirkungen aufweisen.

Einen ähnlichen Effekt könnten auch bestimmte Matrixmaterialien hervorrufen. Die eingesetzte Ethylcellulose hatte jedoch keinen Einfluss auf den energetischen Grundzustand des Komplexes.

Der Rh-Komplex zeigte zudem eine geringe Querempfindlichkeit auf NH₃ (35 ppm) und SO₂ (5 ppm) sowie eine beträchtliche Querempfindlichkeit auf NO₂ (5 ppm) bei der relevanten Wellenlänge (470 nm). CO₂ (5%) hatten keinen Effekt auf den Farbstoff. Die hohe Querempfindlichkeit des Rh-Komplexes gegenüber NO₂ unterstreicht die Bedeutung der gleichzeitigen Messung von NO₂ mit NO₂-selektivem Farbstoff.

Es wurden zudem die Querempfindlichkeiten des Cu-PAN Komplexes gegenüber Formaldehyd (CH₂O), Carbonmonoxid (CO), Ammoniak (NH₃) und Stickstoffdioxid (NO₂) untersucht. In relevanten Wellenlängenbereich (um 550 nm) zeigte Cu-PAN keine Empfindlichkeit gegenüber CH₂O (3,5 ppm) und NO₂ (15 ppm) sowie eine geringfügige

Empfindlichkeit gegenüber CO (40 ppm) und NH₃ (200 ppm), die sich in der Verschiebung des Gesamtspektrums widerspiegelte.

Die Querempfindlichkeit der anderen zwei Farbstoffen wurde nicht getestet. Es wird aufgrund der Wirkungsmechanismen angenommen, dass Bromkresolgrün auf Gase mit basischem Charakter, wie flüchtige Amine, und DPB auf oxidierenden Gase, wie Ozon, querempfindlich sind.

3.3 AP3 Schichtherstellung über Inkjet-Druck (Dataphysics, IPM)

3.3.1 AP3.1 Auswahl von Einbettungsmatrizen (IPM)

Die Tinten für den Inkjet-Druck wurden beim IPM hergestellt und nach den Rückmeldungen bezüglich ihrer Druckbarkeit durch Dataphysics entsprechend modifiziert.

Die schwach polare Ethylcellulose wurde als Polymermatrix für die Einbettung der Farbstoffe ausgewählt. Ethylcellulose ist gesundheitlich unbedenklich und wird sogar in Pharmazie zur Verkapselung von Medikamenten eingesetzt. Aufgrund der hohen Transparenz der Filme und der guten Gasdurchlässigkeit, ist Ethylcellulose ideal geeignet für die Herstellung der gasochromen Schichten.

Die Art der Ethylcellulose sowie die verwendeten Lösungsmittel zur Auflösung der Ethylcellulose wurden im Verlauf des Projekts angepasst, um die Druckbarkeit der Farbstofftinten zu optimieren. Es wurden drei verschiedene Ansätze zur Herstellung polymerer Basislösungen getestet. Zur Herstellung der Farbstofftinten wurden die Farbstofflösungen anschließend mit der polymeren Basislösung in spezifischem Verhältnis vermischt.

Im ersten Ansatz wurde Ethylcellulose mit höherem Molekulargewicht oder „langen Ketten“ (100 cP) in Ethanol aufgelöst. Die erste Basislösung zeigte jedoch schlechte Druckbarkeit aufgrund der hohen Viskosität der Lösung, schnellem Eintrocknen der Druckerdüsen und entsprechend niedriger Druckbildqualität. Im zweiten Ansatz wurde ein Teil des Ethanols durch 1-Butanol ersetzt, das einen höheren Siedepunkt hat und durch stärkere Hydrophobizität ein besseres Lösungsmittel für Ethylcellulose darstellt. Die zweite Basislösung wies ein besseres Trocknungsverhalten auf und die Druckerdüsen wurden seltener verstopft. Allerdings wurde die Viskosität durch den Einsatz von 1-Butanol nicht verbessert und die Druckbildqualität blieb niedrig. In der letzten Formulierung wurde eine andere Ethylcellulose mit geringerem Molekulargewicht bzw. „kurzen Ketten“ (10 cP) verwendet und Ethanol vollständig durch 1-Butanol ersetzt. Durch diese Maßnahmen wurden optimale Viskosität und Oberflächenspannung für den Druckprozess erreicht, was zu verbesserter Druckbarkeit und hoher Druckqualität führte. Beispielhaft sind die Gascharakterisierungen der zwei Farbstoffschichten, Cu-PAN Komplex und Bromkresolgrün, dargestellt. Die Schichten wurden bei DataPhysics auf

Glasträger gedruckt. Abbildung 18 zeigt den zeitlichen Verlauf der Transmissionsänderung bei 555 nm an Cu-PAN-Komplex infolge der Beaufschlagung mit 0,5 ppm H₂S. Der Farbstoff zeigt einen zufriedenstellenden Farbumschlag ebenso für eine geringe H₂S Konzentration. Die Rückreaktion infolge der Spülung mit synthetischer Luft verläuft allerdings langsam.

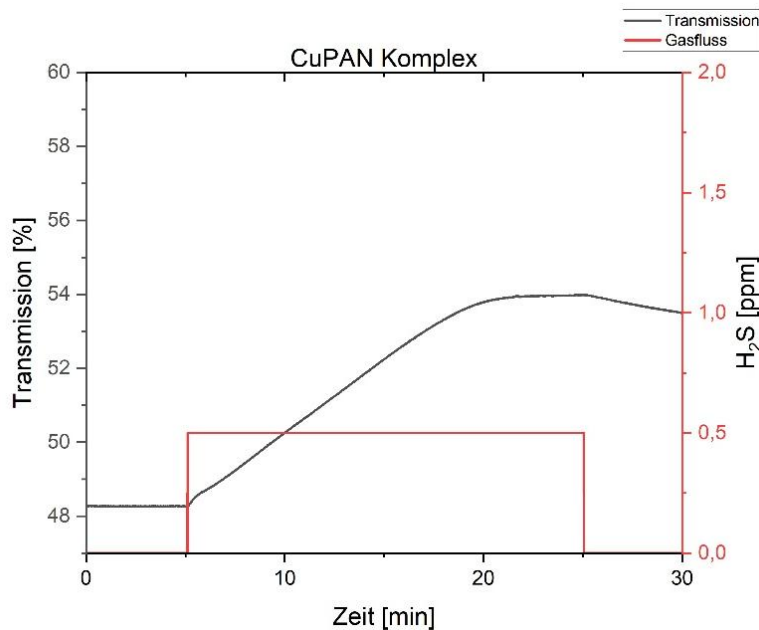


Abbildung 18: Zeitliche Änderung der Transmission bei 555 nm in Folge der Beaufschlagung mit 0,5 ppm H₂S für 20 min; Gemessen an pipettierter und getrockneter Probe auf dem Glassubstrat.

Abbildung 19 zeigt die Reaktion des eingebetteten Bromkresolgrün auf zwei unterschiedliche Konzentrationen von 1 ppm und 10 ppm NH₃. Bromkresolgrün zeigt eine schnelle Hin- und Rückreaktion und beide Konzentrationen sind erfasst. Allerdings kommt der Farbstoff bei der eingestellten Schichtdicke mit 10 ppm NH₃ an die erfassbare Konzentrationsgrenze ($\Delta T \sim 60$).

Die bei Dataphysics gedruckten Schichten der anderen Farbstoffe wurden direkt bei Smartgas vermessen. (Siehe AP5.2 Charakterisierung der Zielgase)

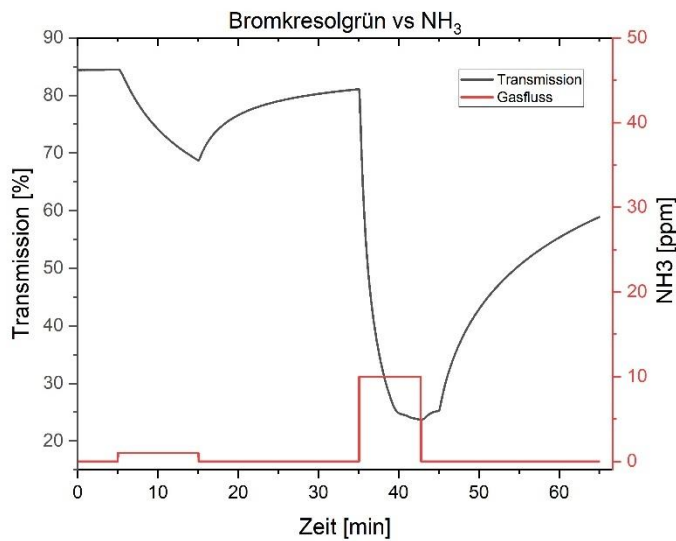


Abbildung 19: Zeitliche Änderung der Transmission bei 620 nm infolge der Wechselwirkung mit 1 ppm und 10 ppm NH_3 in feuchter Luft (50 % r.F.). Die Gasbeaufschlagung dauerte jeweils 10 min.

3.3.2 AP3.2 Bestimmung des Lösungsverhaltens (IPM, Dataphysics)

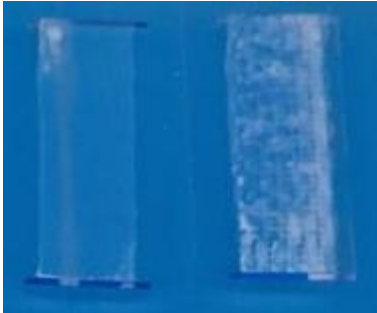
Wie in AP2.2 und AP3.1 erwähnt wurde, hat die Löslichkeit eines Farbstoffes in der Tinte einen großen Einfluss auf die Druckbarkeit der Tinten, die Qualität der gedruckten Filme und die gassensorischen Eigenschaften der Farbstoffschichten.

Die Farbstoffe Bromkresolgrün und Cu-PAN-Komplex zeichneten sich durch ihre gute Löslichkeit in der Standardformulierungen von Ethylcellulose aus. Zur Herstellung der Tinten aus diesen Farbstoffen wurde 1-Butanol eingesetzt, das als Basislösungsmittel für die finalen Tintenformulierungen diene.

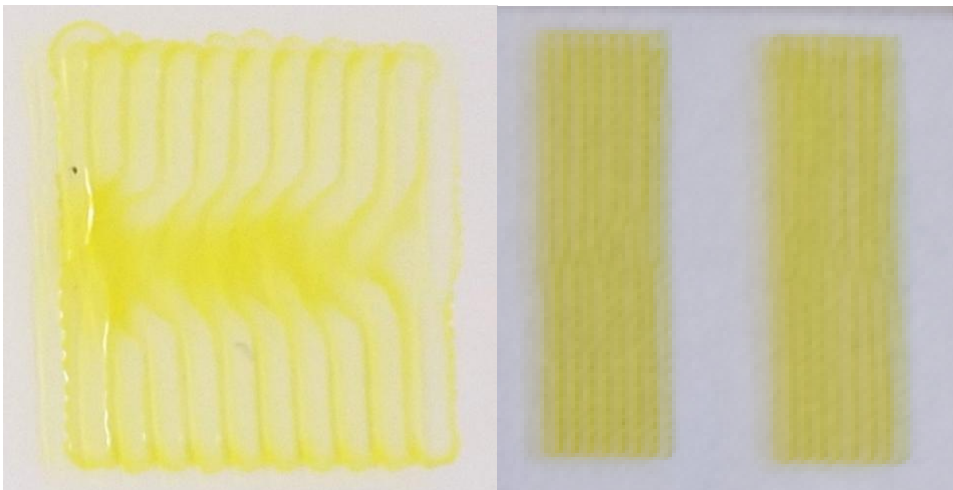
Der Rh-Komplex zeigte eine begrenzte Löslichkeit in 1-Butanol. Es wurden weitere Lösungsmittel getestet, um die Löslichkeit des Rh-Komplexes zu erhöhen. Die stärkeren Lösungsmittel wie Dimethylsulfoxid verbesserten die Löslichkeit, veränderten jedoch die elektronische Struktur des Komplexes und konnten nicht eingesetzt werden. Es wurde kein besseres Lösungsmittel für Rh-Komplex als 1-Butanol gefunden.

Die größten Probleme traten beim DPB-Farbstoff aufgrund seiner schlechten Löslichkeit auf. Die getesteten Lösungsmittel wie Ethanol/Butanol-Gemisch, Chloroform, Toluol, Tetrahydrofuran zeigten entweder keinen zufriedenstellenden Lösungsverhalten oder schlechte Langzeitstabilität der Lösungen. Dimethylsulfoxid wies als einzige Lösungsmittel eine zufriedenstellende Auflösungskraft. Allerdings hat sich beim Drucken der Filme herausgestellt, dass Dimethylsulfoxid sich schlecht mit der Ethylcellulose-Matrix verträgt. Bei der langsamen Trocknung der frisch gedruckten Filme kristallisierte die Ethylcellulose aus, was zur Bildung weißer, trüber Filme führte und die Transparenz der Filme deutlich verringerte (Abbildung 20). Ausgeprägte Kristallbildung wurde insbesondere bei dicken Filmen beobachtet, die durch mehrfaches Drucken erzeugt wurden. Dieser Kristallisationsprozess konnte bei Dataphysics durch die

Beschleunigung der Trocknung unterbunden werden, indem die Temperatur der Unterplatte des Druckers erhöht wurde (Abbildung 21).



*Abbildung 20:
 Kristallisation der
 Ethylcellulose (rechts)
 ohne Heizung. Fast keine
 Kristallisation auf dem
 linken Objektträger.*



*Abbildung 21:
 Tintenverlauf ohne
 beheizte
 Grundplatte (links)
 und mit beheizter
 Grundplatte
 (rechts).*

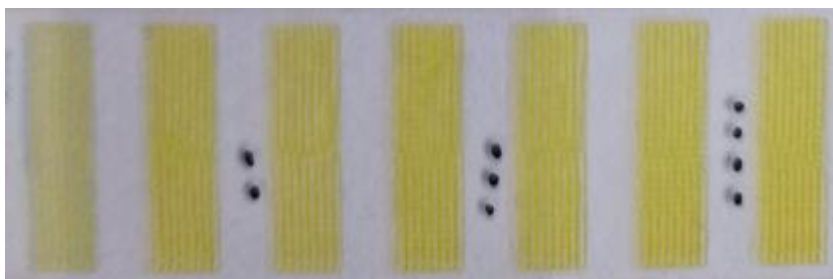
3.3.3 AP3.3 Entwicklung des Druckprozesses (Dataphysics)

Als Träger für den Druckprozess wurden Objektträger mit 45° geschliffenen Kanten benutzt. Die Oberfläche wurde dazu vor dem Druck mit 2-Propanol gründlich gereinigt und getrocknet. Als Druckkopf wurde das PDDS der Fa. Dataphysics benutzt. Die Druckkartusche wurde mit einer Öffnung von 100µm gewählt. Dadurch wurde das Blockieren der einzelnen Tinten beim Druckprozess minimiert. Bei Druckkartuschen von 50 µm konnten lediglich 5-6 Bahnen auf dem Objektträger aufgebracht werden. Danach war die kleine Öffnung durch das Eintrocknen blockiert. Ein kontinuierliches Drucken war damit nicht möglich. Der Druckkopf wurde auf einem Goniometer der Fa. Dataphysics OCA 200 montiert und damit die Automation des Druckprozesses programmiert. Anfangs wurden mehrere Bereiche auf einem Objektträger gedruckt. Die Druckgröße betrug 30 mm x 10 mm. Der Abstand der einzelnen Tropfen betrug 0,5 mm. Die Tropfengröße auf

dem Objektträger entsprach ca. 500 μl . Dabei wurden 10 Einzeltröpfchen generiert, um die Tinte im Druckkopf nicht antrocknen zu lassen, denn dies hätte den Druckprozess blockiert.

3.3.4 AP3.4 Schichtcharakterisierung

Durch das Verlaufen der einzelnen Tropfen kam es zur Agglomeration der Tinte in Streifen auf dem Objektträger. Ein schnelleres Abtrocknen der Tinte auf dem Objektträger konnte dies verhindern und eine gleichmäßigere Schicht erzeugt werden. Das Abtrocknen geschah durch Anwärmen der Oberfläche auf 40-50°C. Um die Schichtdicke zu vergrößern, wurden zwei Schichten übereinander gedruckt. Die finalen Detektoren wurden dann auf vorgeschrittenen Objektträgern einzeln bedruckt. Für alle Tinten wurden zweilagige Farbstoffschichten hergestellt (Abbildung 22).



*Abbildung 22:
 Unterschiedliche
 Schichtdicken der NH₃
 Tinte.
 Der erste Streifen nur
 einlagig, die beiden
 nächsten 2-lagig, dann 2
 Streifen 3-lagig und die
 letzten beiden 4-lagig.*

3.4 AP4 Konzeption und Entwicklung eines Schadgasmesssystems für Filterstufen von PEM (smartGAS, IPM)

3.4.1 AP4.1 Erstellung des Systemkonzepts (Schadgasmesssystems) (smartGAS)

Aufbauend auf den in AP 1 erarbeiteten Spezifikationen, wurde in diesem Arbeitspaket das detaillierte Konzept für das Schadgasmesssystem ausgearbeitet. Dabei lag der besondere Fokus auf der präzisen Definition der Schnittstellen, um eine fehlerfreie Integration aller Module in den Demonstrator sicherzustellen.

3.4.2 AP4.2 Aufbau eines einkanaligen Sensors (smartGAS)

Unter Verwendung von 3D-Druck und eines STM-EVAL-Boards mit einem eigens entwickelten Shield wurde ein robuster sowie flexibel anpassbarer Demonstrator für die Zielgase CO, NH₃, NO₂ und H₂S aufgebaut. Ziel dieses einkanaligen Sensors ist es, den Funktionsnachweis des Messsystems zu erbringen

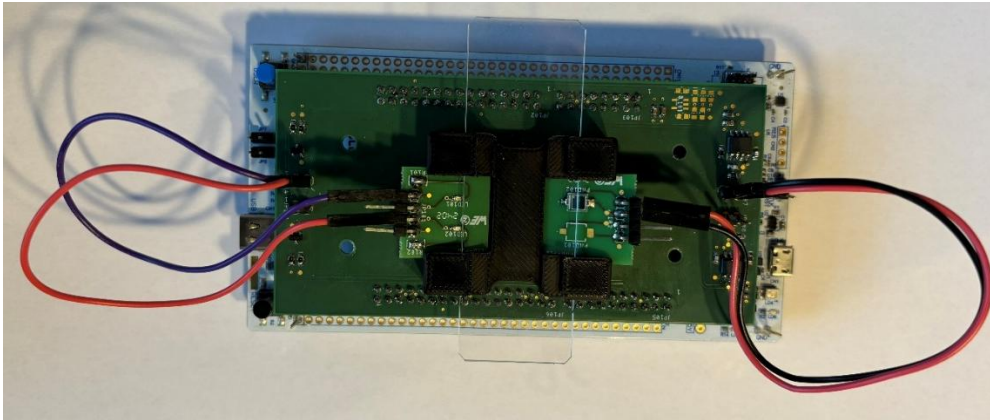


Abbildung 23:
Einkanaliger
Demonstrator.

3.4.3 AP4.3 Aufbau eines mehrkanaligen Sensors (smartGAS)

Im Rahmen von AP 4.3 wurde mit den Erkenntnissen aus dem vorhergehenden Arbeitspaket (AP 4.2) ein verbesserter, mehrkanaliger Demonstrator entwickelt. Dieser Demonstrator berücksichtigt alle Zielgase (Kohlenmonoxid, Stickstoffdioxid, Ammoniak und Schwefelwasserstoff) sowie den Referenzkanal. Dabei werden die jeweiligen Zielbereiche abgedeckt:

- CO: 1 - 50 ppm
- NO₂: 2 - 10 ppm
- NH₃: 10 - 200 ppm
- H₂S: 1 - 5 ppm

Das Sensorsystem wurde außerdem um zusätzliche Sensoren zur Erfassung der Umgebungsbedingungen (wie Temperatur, Druck und Feuchte) erweitert, um eine zuverlässige und praxisnahe Messung zu ermöglichen. Für den Aufbau kommen verschiedene Aufbau- und Verbindungstechniken zum Einsatz, mit Fokus auf einen robusten und anpassbaren Demonstrator.

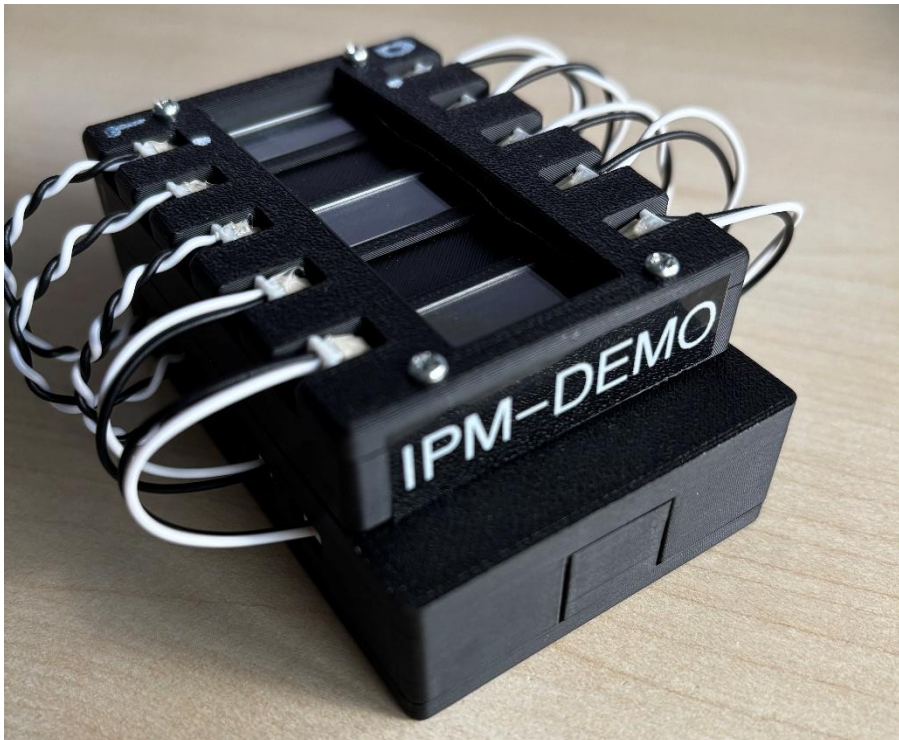


Abbildung 24:
Mehrkanaliger
Demonstrator.

3.4.4 AP4.4 Simulation der optischen Komponenten (smartGAS)

Die im Rahmen von AP 4.1 ausgewählten optischen Komponenten wurden hinsichtlich ihrer Eignung für das Messsystem eingehend geprüft. Ziel dieser Untersuchungen war es, ein umfassendes Verständnis für das Zusammenspiel der Komponenten in Bezug auf die ATR-Messtechnik zu gewinnen und die optimale Integration in das Gesamtsystem sicherzustellen.

3.4.5 AP4.5 Entwicklung der Ansteuerungs- und Auswerteelektronik (smartGAS, IPM)

Durch die Auslegung und Simulation verschiedener Vorverstärker- und Ansteuerungselektroniken wurde ein geeignetes Elektronikmodul für den Betrieb der LED (Lichtquelle) und der Photodiode (Detektor) entwickelt. Im Anschluss an die Auslegung begann die Entwicklung und Realisierung des aufsteckbaren Shields (Leiterplatte) für den einkanaligen Demonstrator.

3.4.6 AP4.6 Softwareentwicklung des Messsystems (smartGAS)

Im Rahmen dieses Arbeitspakets wurden zentrale Grundmodule der Systemsoftware entwickelt und implementiert. Dazu zählen:

- Rauscharme Signalverarbeitung und Eingangsfilterung
- Filterung der Eingangssignale
- Schnittstellen Interface USB-C für Service und Kalibrierung

-
- Schnittstellen Interface der Industrieschnittstelle
 - Weiter digitale Filter
 - Auswertalgorithmus

Diese Softwaremodule bilden die Grundlage für einen zuverlässigen und leistungsfähigen Betrieb des Messsystems.

3.4.7 AP4.7 Service- und Kalibrierschnittstelle des Messsystems (smartGAS)

Im Rahmen des Arbeitspakets 4.7 lag der Fokus auf der Entwicklung einer Service- und Kalibrierschnittstelle für das Messsystem. Ziel war es, eine robuste und anwenderfreundliche Lösung bereitzustellen, die sowohl Wartungsarbeiten als auch regelmäßige Kalibrierungen der Sensoren zuverlässig ermöglicht.

Hierfür wurde eine Anwendungssoftware „HostSW“ entwickelt, welche es ermöglicht die Daten aus den aufgeführten Modulen zu speichern und zu editieren. Dies ist sowohl mit der USB-Schnittstelle (Service-Schnittstelle), als auch mit der Industrie-Schnittstelle möglich.

3.5 AP5 Gasabhängige Charakterisierung (smartGas, IPM)

3.5.1 AP5.1 Aufbau des Messstandes (smartGAS)

Es wurde bislang lediglich ein erster Messaufbau in Form einer Begasungsbox realisiert. Dieser dient vorrangig dazu, die nachfolgende Bearbeitung von AP 5.2 („Charakterisierung der Zielgase“) zu ermöglichen.

Ein umfassender, realitätsnaher Messstand zur gasabhängigen Charakterisierung des entwickelten Schadgasmesssystems wurde in diesem Arbeitspaket jedoch noch nicht konzipiert und aufgebaut. Die bisherigen Maßnahmen konzentrierten sich auf die Schaffung einer grundlegenden Testmöglichkeit, um erste Charakterisierung zu starten und methodische Erkenntnisse für die weitere Entwicklung zu gewinnen.

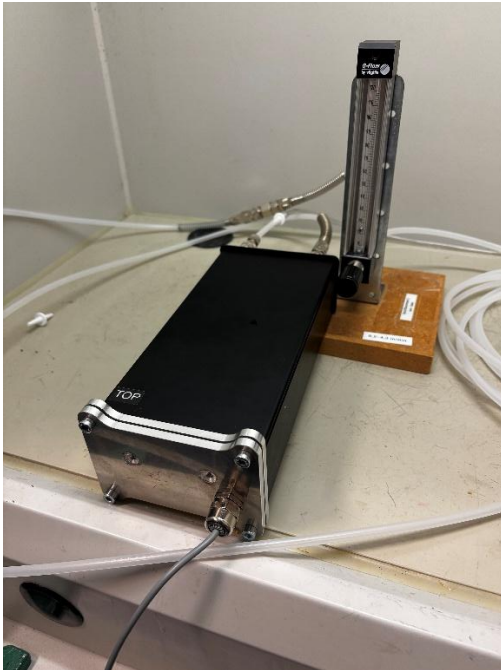


Abbildung 25: Erster Messaufbau, um den Demonstrator zu begasen.

3.5.2 AP5.2 Charakterisierung der Zielgase (smartGAS)

Im Arbeitspaket 5.2 war die Charakterisierung der Zielgase vorgesehen. Die ursprünglich geplanten Messungen der Alarm- beziehungsweise Auslöseschwellen konnten bislang nicht realisiert werden, da das aktuelle System derzeit noch keine direkten Konzentrationswerte ausgeben kann, sondern lediglich Rohwerte erfasst und ausgibt. Dennoch konnten aus den vorhandenen Sensordaten, welche durch Messungen (*Abbildung 23-26*) mit den Demonstratoren erzeugt wurde, wichtige Erkenntnisse zur grundsätzlichen Funktionsweise des Systems sowie gewonnen werden. Insbesondere wurde das Verhalten des Sensorsystems an den vorgesehenen Zielgasen erprobt und analysiert. Trotz der eingeschränkten Möglichkeiten zur exakten Konzentrationsbestimmung liefert dies wertvolle Hinweise zur weiteren Optimierung des Systems.

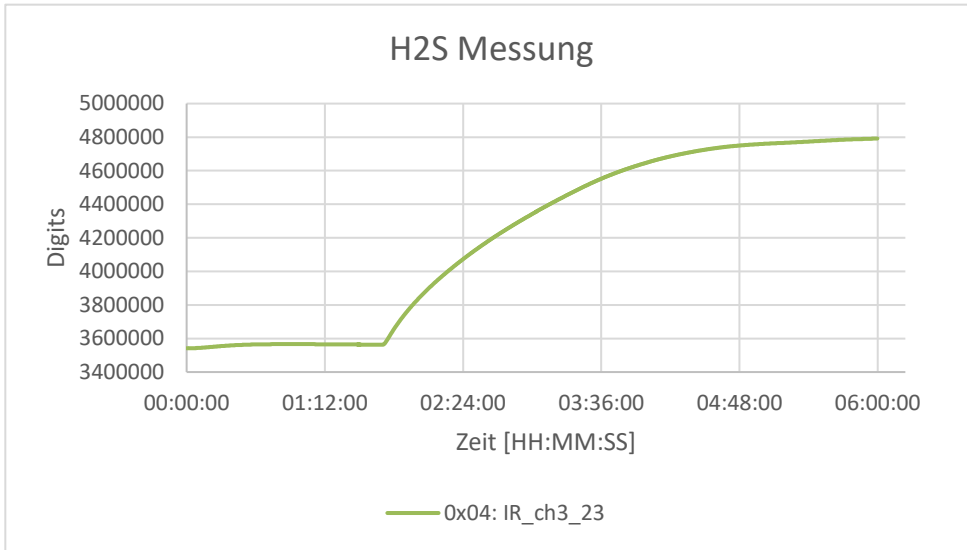


Abbildung 26: Messung des H₂S-Farbstoffes mit 10ppm H₂S.

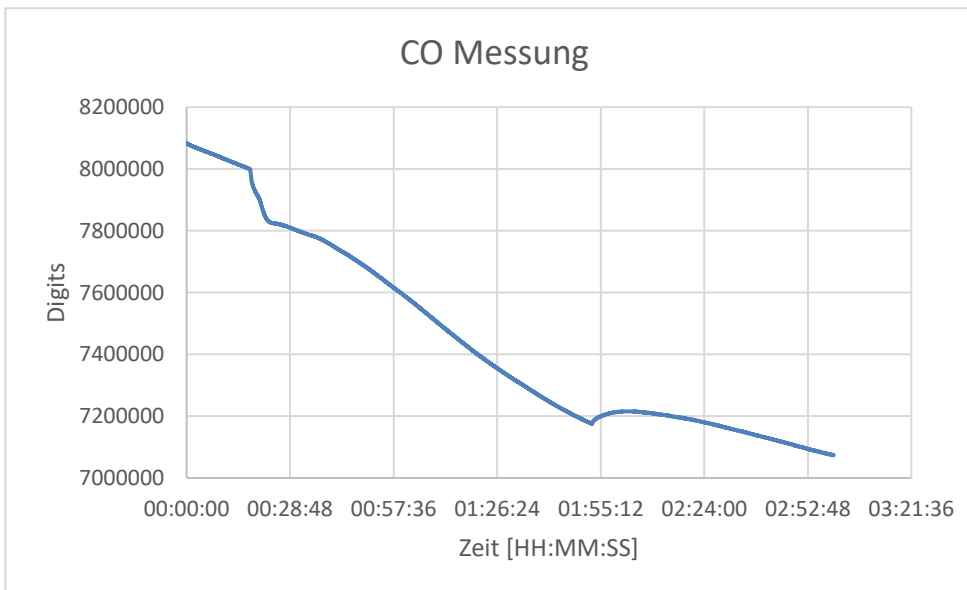


Abbildung 27: Messung des CO-Farbstoffes mit 50ppm CO.

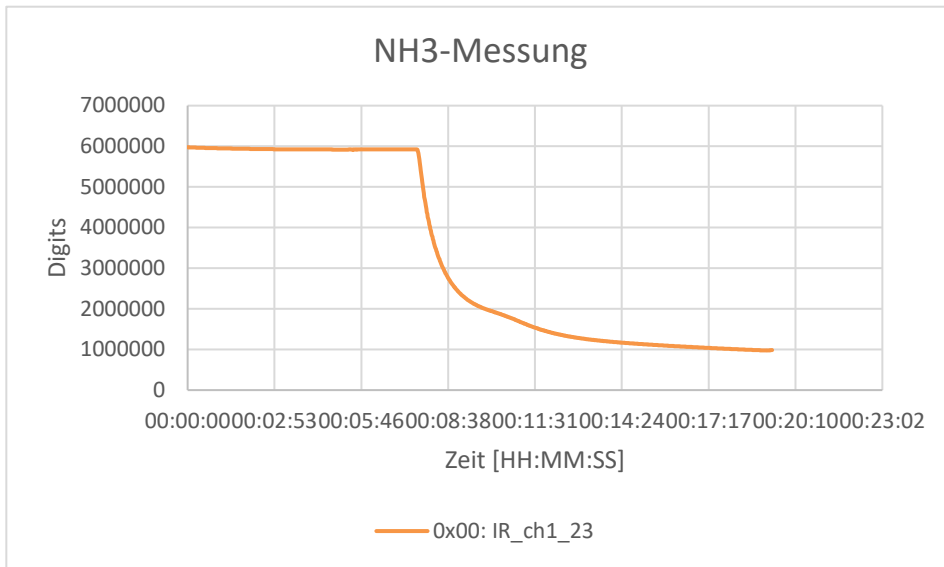


Abbildung 28: Messung des NH₃-Farbstoffes mit 10ppm NH₃.

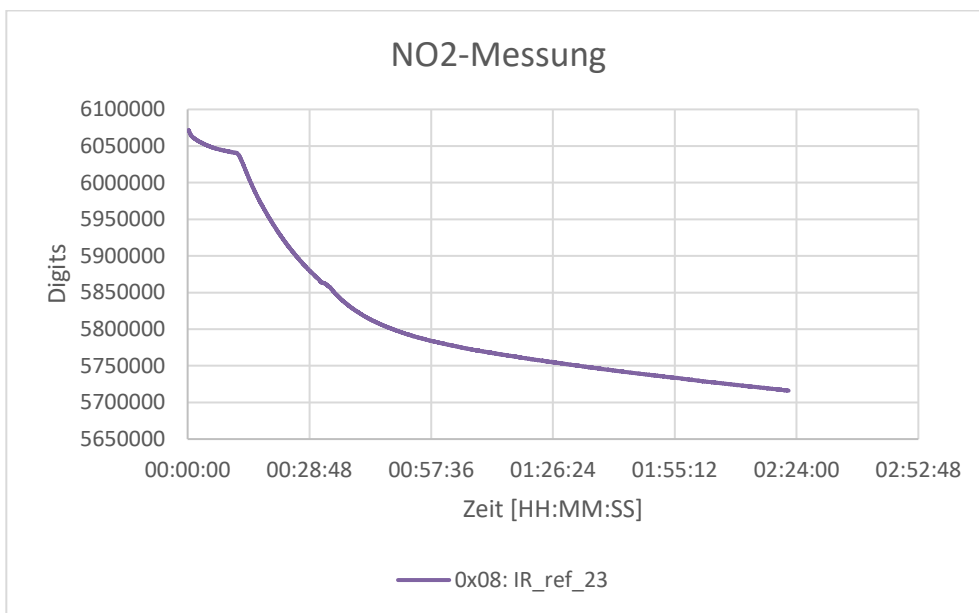


Abbildung 29: Messung des NO₂-Farbstoffes mit 10ppm NO₂.

3.5.3 AP5.3 Untersuchung von Störgrößen (smartGAS)

Die Arbeiten zur Untersuchung von Störgrößen konnten im Berichtszeitraum leider nicht abgeschlossen werden. Aufgrund der Verzögerungen in den vorangegangenen Arbeitspaketen, insbesondere beim Aufbau eines mehrkanaligen Sensors (AP 4.3) und bei der Charakterisierung der Zielgase (AP 5.2), blieb für die geplanten Untersuchungen hinsichtlich möglicher Störeinflüsse wie Temperatur-, Feuchte- oder Fremdgaskomponenten keine ausreichende Zeit. Entsprechende Versuchsreihen zur

systematischen Identifikation und Quantifizierung dieser Störgrößen sind daher bislang nicht erfolgt.

3.5.4 AP 5.4 Vibrations- und Rütteltests (IPM)

Die Vibrations- und Rütteltests am Multikanal-Demonstrator wurden durch das Fraunhofer-Institut für Physikalische Messtechnik (IPM) auf der dortigen Rüttelplatte durchgeführt. Zunächst mussten mittels 3D-Druck Halterungen für X, Y und Z-Richtung designet und gedruckt werden. In Abbildung ist links die Zeichnung der Halterung in X-Richtung für den 3D-Druck dargestellt. Auf der rechten Seite erkennt man die Halterung während eines laufenden Tests auf der Rüttelplatte inklusive Mehrkanal-Demonstrator. Die Tests erfolgten gemäß den relevanten Vibrations- und Rüttelnormen (DIN EN 61373 VDE 0115-106:2011-04) für den Bahnverkehr. Alle Prüfungen wurden erfolgreich absolviert, wobei der Multikanal-Demonstrator nach Abschluss der Testreihe weiterhin voll funktionsfähig war. Damit konnte die Robustheit des Systems gegenüber den im Bahnverkehr zu erwartenden mechanischen Belastungen nachgewiesen werden. Dieser Test gilt jedoch lediglich als Vorprüfung für eine zukünftige Zertifizierung.

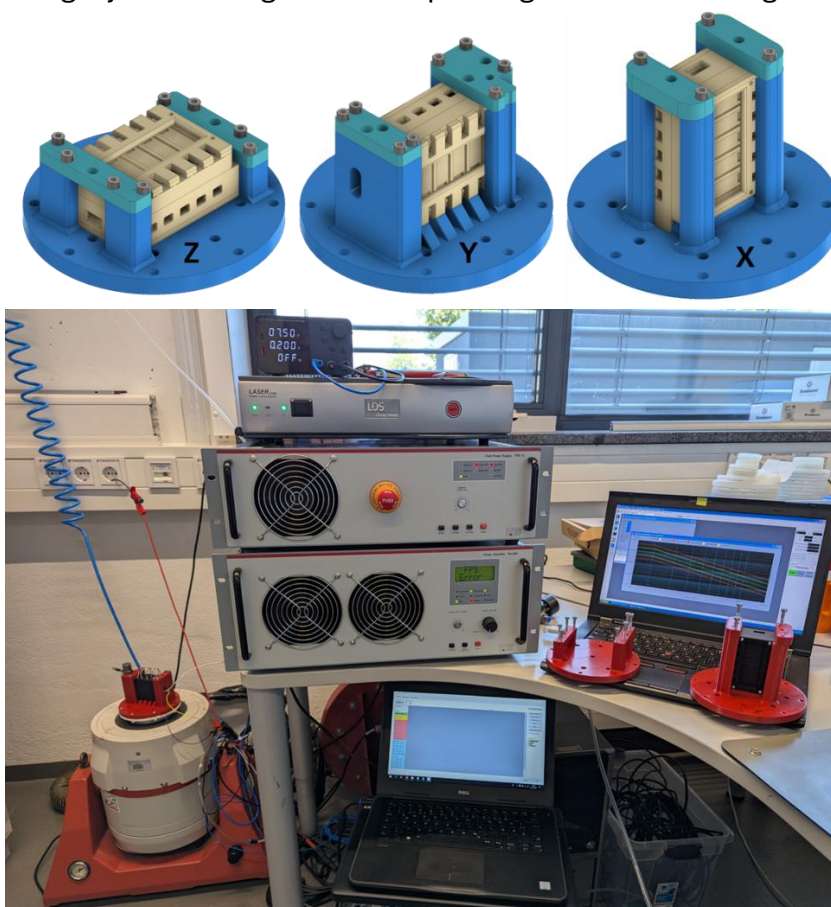


Abbildung 30: Oben: Zeichnungen der Halterung für den 3D-Druck für alle drei Achsen. Unten: Foto des Messaufbaus am Fraunhofer IPM.

3.5.5 AP5.5 Adaption am Brennstoffzellenzug

Dieses Arbeitspaket konnte im aktuellen Bearbeitungszeitraum nicht realisiert werden.

3.5.6 AP5.6 Durchführung von Feldtests

Dieses Arbeitspaket konnte im aktuellen Bearbeitungszeitraum nicht realisiert werden.

3.6 AP6 Öffentlichkeitsarbeit, Ergebnissicherung (smartGAS, IPM, Dataphysics)

Im Rahmen der Öffentlichkeitsarbeit wurden während des Projektverlaufs mehrere Maßnahmen zur Information über den Projektfortschritt und die angestrebten Ergebnisse ergriffen. Hierzu gab es interne Präsentationen sowie die Vorbereitung von Informationsmaterialien für Projektpartner und interessierte Kreise. Die wesentlichen Zwischenergebnisse und Erkenntnisse wurden fortlaufend dokumentiert, um eine nachhaltige Ergebnissicherung zu gewährleisten. Darüber hinaus erfolgte eine strukturierte Ablage aller relevanten Unterlagen und Messergebnisse, sodass diese auch nach Projektende nachvollziehbar zur Verfügung stehen.

Teile der Projektergebnisse wurden von Fraunhofer IPM anhand eines Konferenzbeitrages auf der IMCS (International Meeting on Chemical Sensors) 2025 vorgestellt (Olena Yurchenko et al.: Colorimetric NO₂ detection using N,N'-diphenylbenzidine indicator). Die Konferenzbeiträge wurden noch nicht veröffentlicht.

Zusätzlich veröffentlichte Fraunhofer IPM auf der Homepage einen Beitrag zum Projekt ‚Druide‘ (<https://www.ipm.fraunhofer.de/de/gf/gastechnologie-spektroskopie/anw/umwelt/toxische-gase-detektion/projekt-druide-gassensoren-filter-brennstoffzellen.html>).

3.7 Ergebniszusammenfassung

In der folgenden Tabelle sind stichpunktartig die wichtigsten Ergebnisse der Arbeitspakete zusammengefasst.

	Arbeitspakete	Wichtigste Ergebnisse
1	Spezifikation und Konzeptentwicklung	<ul style="list-style-type: none"> Erstellung eines Pflichtenheft mit Schnittstellendefinition
2	Synthese gasochromer Farbstoffe	
2.1	Farbstoffsynthese	<ul style="list-style-type: none"> Synthese der betreffenden Farbstoffen erfolgreich durchgeführt
2.2	Gasabhängige Charakterisierung	<ul style="list-style-type: none"> Farbstoffen charakterisiert
2.3	Untersuchung von Störgrößen	<ul style="list-style-type: none"> Störgrößen teilweise ermittelt
3	Schichtherstellung über Inkjet-Druck	
3.1	Auswahl von Einbettungsmatrizen	<ul style="list-style-type: none"> Druckbare Einbettungsmatrix evaluiert
3.2	Bestimmung des Lösungsverhaltens	<ul style="list-style-type: none"> Lösungseigenschaften optimiert
3.3	Entwicklung des Druckprozesses	<ul style="list-style-type: none"> Druckbarkeit mit beheizter Unterlage optimiert
3.4	Schichtcharakterisierung	<ul style="list-style-type: none"> Mehrschichtsystem zweilagig als optimale Schichtdicke
4	Konzeption und Entwicklung eines Schadgasmesssystems für Filterstufen von PEM	
4.1	Erstellung des Systemkonzepts (Schadgasmesssystems)	<ul style="list-style-type: none"> detaillierte Konzept für das Schadgasmesssystem erstellt
4.2	Aufbau eines einkanaligen Sensors	<ul style="list-style-type: none"> Aufbau eines robusten und leicht adaptierbaren Demonstrators für das Zielgas CO, NH₃, H₂S. Ziel des einkanaligen Sensors ist es, den Funktionsnachweis des Messsystems zu erbringen.
4.3	Aufbau eines mehrkanaligen Sensors	<ul style="list-style-type: none"> Der mehrkanalige Sensorsystem wurde aufgebaut.
4.4	Simulation der optischen Komponenten	<ul style="list-style-type: none"> Die in AP 4.1 ausgewählten optischen Komponenten wurden auf ihre Eignung untersucht.
4.5	Entwicklung der Ansteuerungs- und Auswerteelektronik	<ul style="list-style-type: none"> Die Ansteuerungs- und Auswerteelektronik sind entworfen Die entwickelten Schaltungsteile wurden durch Simulationen geprüft und verifiziert
4.6	Softwareentwicklung des Messsystems	Entwicklung modulare Systemsoftware: <ul style="list-style-type: none"> Modul Serviceschnittstelle (USB) / Industrieschnittstelle Modul Flash und EEPROM Modul Signalanalyse und FFT-Auswertung Digitale Filter für die Datenausgabe

4.7	Service- und Kalibrierschnittstelle des Messsystems	<ul style="list-style-type: none"> Anwendungssoftware „HostSW“ entwickelt für USB-Schnittstelle (Service-Schnittstelle), als auch für die Industrie-Schnittstelle
5	Gasabhängige Charakterisierung	
5.1	Aufbau des Messstandes	<ul style="list-style-type: none"> Begasungsbox als erster Messaufbau umgesetzt kein realitätsnaher Messstand zur gasabhängigen Charakterisierung aufgebaut
5.2	Charakterisierung der Zielgase	<ul style="list-style-type: none"> Nur Grundfunktion des Systems evaluiert keine Messung von Alarmschwellen möglich nur Rohwerte ausgegeben
5.3	Untersuchung von Störgrößen	<ul style="list-style-type: none"> Nicht durchgeführt
5.4	Vibrations- und Rütteltests	<ul style="list-style-type: none"> Durch IPM nach Bahn-Norm erfolgreich durchgeführt Multikanal-Demonstrator auch nach den Tests funktional
5.5	Adaption am Brennstoffzellenzug	<ul style="list-style-type: none"> Nicht durchgeführt
5.6	Durchführung von Feldtests	<ul style="list-style-type: none"> Nicht durchgeführt
6	Öffentlichkeitsarbeit, Ergebnissicherung	Öffentlichkeitsarbeit und Dokumentation der Ergebnisse wurden zusammenfassend sichergestellt.

Tabelle 1: Ergebniszusammenfassung.

4.0 Vergleich des Vorhabenstands mit der ursprünglichen Arbeits-, Zeit- und Kostenplanung

Im Verlauf des Projekts wurde eine Verlängerung um sechs Monate erforderlich, da es zu Verzögerungen in mehreren Arbeitspaketen kam. Somit hat sich der Projektzeitraum von 24 Monate auf 30 Monate verlängert.

Trotz der Verlängerung des Bearbeitungszeitraums konnte nicht jedes Arbeitspaket vollständig bearbeitet werden. Insbesondere mussten die Arbeitspakete AP5.3, AP5.5 und AP5.6 zurückgestellt werden, da im Projektverlauf andere Aufgaben priorisiert und mehr Zeit für zentrale Entwicklungsschritte benötigt wurde.

5.0 Haben sich die Aussichten für die Erreichung der Ziele des Vorhabens innerhalb des angegebenen Berichtszeitraums gegenüber dem ursprünglichen Antrag geändert (Begründung)?

Im Verlauf des Projekts ergaben sich Verzögerungen in mehreren Arbeitspaketen, weshalb der Bearbeitungszeitraum um sechs Monate verlängert werden musste. Trotz der verlängerten Projektlaufzeit konnten jedoch nicht alle ursprünglich geplanten Arbeitspakete vollständig abgeschlossen werden. Insbesondere die Arbeitspakete

AP5.3, AP5.5 und AP5.6 konnten im aktuellen Berichtszeitraum nicht bearbeitet werden. Dadurch haben sich die Aussichten für die vollständige Erreichung der zu Beginn des Projekts definierten Ziele im vorgesehenen Zeitraum entsprechend verändert. Die zentralen Projektziele wurden dennoch weitgehend erreicht, auch wenn einige Teilaspekte in den genannten Arbeitspaketen zurückgestellt werden mussten.

6.0 Sind inzwischen von dritter Seite FE-Ergebnisse bekannt geworden, die für die Durchführung des Vorhabens relevant sind?

Nein

7.0 Sind oder wurden Änderungen in der Zielsetzung notwendig?

Im Verlauf des Projekts wurden die definierten Zielsetzungen kontinuierlich überprüft und evaluiert. Aus heutiger Sicht sind keine grundlegenden Änderungen an der ursprünglichen Zielsetzung erforderlich. Kleinere Anpassungen wurden im Rahmen des Projektverlaufs vorgenommen, beeinflussen jedoch nicht den Gesamtcharakter oder die Hauptausrichtung des Projekts.

Eine aktiv vorgenommene Änderung ist die Änderungen der Zielbereiche, die abgedeckt werden sollen. Die Zielbereiche wurden auf folgende Größen geändert:

- CO: 1 - 50 ppm
- NO₂: 2 - 10 ppm
- NH₃: 10 - 200 ppm
- H₂S: 1 - 5 ppm

Da die angefragten Gaslieferanten keine kleineren Konzentrationen mischen könnten, haben wir die kleinstmöglichen mitgeteilten Konzentrationen der Lieferanten als niedrigsten Grenzwerte neu definiert.